

# Struktura, dynamika a reaktivita hydratovaného elektronu

Frank Uhlig

Tato práce se zabývá zkoumáním hydratovaného elektronu, který je jedním z produktů ionizace vody a klíčovým meziproduktem radiační chemie ve vodném prostředí. Ačkoli se o existenci hydratovaného elektronu ví již více než 50 let, jeho struktura je těžko postižitelná a je předmětem diskuzí až do současnosti. V této práci jsme ukázali, že pomocí ab initio metod lze získat věrohodný popis hydratovaného elektronu, jeho rovnovážné struktury, jeho dynamiky po zachycení vodou a jeho reaktivity. Za tímto účelem byly zkoumány malé klastrové modely i rozsáhlé systémy modelující jak vnitřek, tak povrch kapaliny s rozpuštěným elektronem.